

プロジェクト名(タイトル):

大規模並列計算機を用いた強相関量子多体系シミュレーションコードの開発とその応用
利用者氏名:

○白川 知功(1,2)、曾田 繁利(1,2,3)、関 和弘(2)、上田 宏(4)、榊原 寛史(4)、Qinfang Zhang(4)

理研における所属研究室名:

- (1) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム
- (2) 量子コンピュータ研究センター 量子計算科学研究チーム
- (3) 計算科学研究センター 運用技術部門 ソフトウェア開発技術ユニット
- (4) 開拓研究本部 柚木計算物性物理研究室

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

遷移金属酸化物、希土類-アクチノイドを含むf電子系化合物、および、分子性導体などに代表される物質群の電子状態を捉えるためには、電子が飛び回るホッピング項と電子間の相互作用項の両者を重要な役割を果たしていると考えられるため、量子多体系と呼ばれている。こうした量子多体系のシュレーディンガー方程式は量子多体問題と呼ばれ、解析的に解くことが難しいため、理論的解明には大規模な数値シミュレーションが大きな役割を果たしてきた。これまでも、第一原理バンド計算、量子モンテカルロ法、繰り込み群法、クラスター近似法など、様々な量子多体問題を解くための方法が考案され、発展してきたが、すべての問題に有効な万能な計算手法というものは現時点ではない。

そこで、本課題では、それぞれの量子多体計算手法を専門として研究を行ってきたメンバーを集め、これまで培ってきた計算手法をさらに発展させると同時に、それぞれの計算手法についての比較を行いながら、量子多体問題の統一的な理論解明を目指してきた。特に、前年度までは、量子多体系のダイナミクスに関連する方法論のコード開発などを行い、さらに近年では量子計算機を用いる量子-古典ハイブリッド計算に関する研究も行ってきた。

本年度は、昨年度に引き続き、これまで開発してきた方法の応用研究に加え、量子多体問題を解くための量子-古典ハイブリッド計算方法の開発に取り組んだ。

2. 具体的な利用内容、計算方法

【密度行列繰り込み群法を用いたスピン流の研究】

電子スピンの流れを指すスピン流は本来数10マイクロメートルほどで緩和が起こるため、物質の性質を考える上では特に影響がない量として無視されてきた。ところが、微細

加工技術の進展により、ナノテクノロジーを対象としたナノデバイスで、実際にスピン流が観測できるようになってきた。これに伴い、電子の持つ電荷の流れである電流に加えて、このスピン流を積極的に利用しようとする「スピントロニクス」が、次世代デバイス技術として注目されるようになった。

スピン流を生成・制御する上で重要な分野として、スピン軌道相互作用に起因するスピンホール効果や逆スピンホール効果を利用したスピン流-電流相互変換に関する研究が挙げられる。こうした問題を理論的に研究を行う場合、スピン流が流れる磁性体とスピン軌道相互作用を持つ電子系の接合系における量子多体問題を考える必要があり、数値的なシミュレーションを行うことが難しいとされてきた。

そこで、本研究では、これまでの本プロジェクトで磁性不純物問題を解くために開発した「ブロックランチョス密度行列繰り込み群法」の方法論を、この問題に応用することで、量子多体系である量子スピン鎖と自由フェルミオン系の接合系の時間発展シミュレーションを行った[図1参照]。

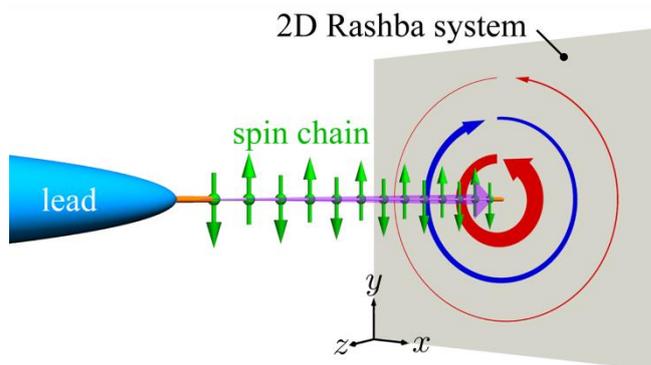


図1: フェルミオンリード-量子スピン鎖-2次元ラッシュバ系の接合系。シミュレーションでは、フェルミオンリード(シアン)に磁場を印加することで量子スピン鎖にスピン流を発生させ(紫)、これをスピン軌道相互作用系である2次元ラッシュバに注入した。

【量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの提案】

量子コンピュータの有効活用方法として、量子化学に代表される量子多体問題への応用が注目されている。ただし、現在利用可能な量子コンピュータは量子誤り耐性を持たない、いわゆる、Noisy Intermediate-scale quantum (NISQ) デバイスと呼ばれるものであり、ゲート数や量子ビット数の制限が大きい。そこで、こうした NISQ デバイスへ柔軟に対応できる方法として、変分量子アルゴリズム (VQA) が注目されている。この方法では、変数を含む量子回路から量子コンピュータによって計算される期待値を変分関数として、これらの期待値をもとに、古典計算機上で変分パラメータを更新していく、いわゆる、量子-古典ハイブリッド計算アルゴリズムである。ただし、この方法には、Barren plateau 現象と呼ばれる、量子ビット数と量子ゲート数に応じて、微分が指数関数的に消失する最適化の困難性が報告されており、現時点では、アルゴリズムレベルで古典計算機を凌駕するには至っていない。また、一つの解決策と考えられるのは、より良い回路構造を探索することであるが、未知の問題に対して、どのような回路を用意すれば良いかは非自明である。

そこで、本プロジェクトでは、与えられた量子状態について、それを再現するような量子回路を自動で生成する量子-古典アルゴリズム「量子回路符号化法」を提案するために、量子計算のシミュレーションを行った。特に、提案した手法では、テンソルネットワーク法の最適化方法の知見をもとにした回路を構成する方法を提案した。また、パラメータの最適化は頭に行わず、与えられたユニタリ演算子の表現行列から、代数的に回路を構築する方法を採用した。より詳細な計算方法については、以下の arXiv に公開している。

T. Shirakawa, H. Ueda, and S. Yunoki, “Automatic quantum circuit encoding of a given arbitrary quantum state”, arXiv:2112.14524.

3. 結果

【密度行列繰り込み群法を用いたスピン流の研究】

図2は、今回のシミュレーションで得られたスピン流注入している際の、2次元ラッシュバ系上での電流密度を示したものであり、スピン流が注入される点を中心とした電流の渦が徐々に形成されていくことがわかった。この結果は、このシミュレーションによって初めて確認された現象である。

研究結果のより詳細に関しては、発表論文を参照[利用研究成果リスト、2,3,5]。

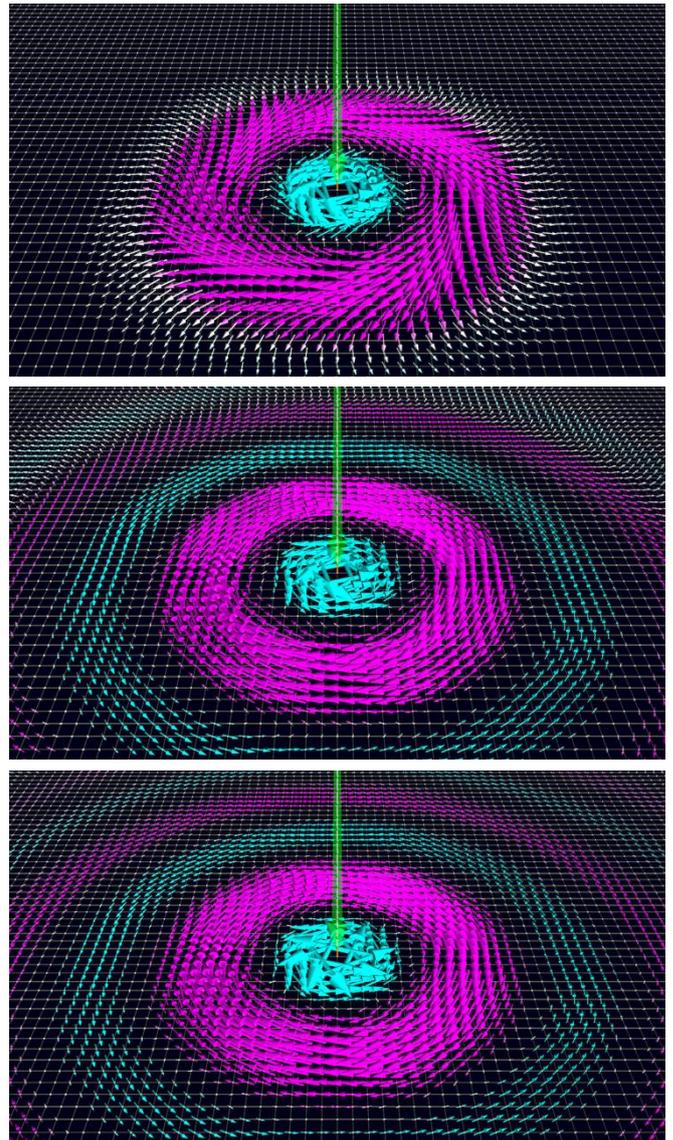


図2:シミュレーションで得られたスピン流注入開始後の2次元ラッシュバ系上での電流密度の空間分布。緑は注入しているスピン流、マゼンダとシアンはそれぞれ注入する点を中心として上から見た時に時計周り(時計と逆回り)の成分の大きさを示す。

【量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの提案】

図3は、1次元 XY 模型の基底状態に対して、提案した量子回路符号化法を用いたときの、Fidelity を調べたものである。 L は系のサイズ(量子ビット数)、 M は2量子ビットユニタリ演算子の数を表す。1次元 XY 模型に関しては、本プロジェクトの以前の課題で $M=L/4$ の時に、厳密な回路を構成できることを報告しており、縦の点線はそれぞれのサイズに関してその数を示すものである。今回提案する方法では、この数で実際に高精度な結果が回路構造に関して何の仮定もせず得られていることが示された。さらに $M < L/4$ の時は、以前報告した回路よりも良い結果が得られた。

研究結果は現在投稿中であり、詳細に関しては、arXiv にて公開している[T. Shirakawa, H. Ueda, and S.

Yunoki, “Automatic quantum circuit encoding of a given arbitrary quantum state”, arXiv:2112.14524].

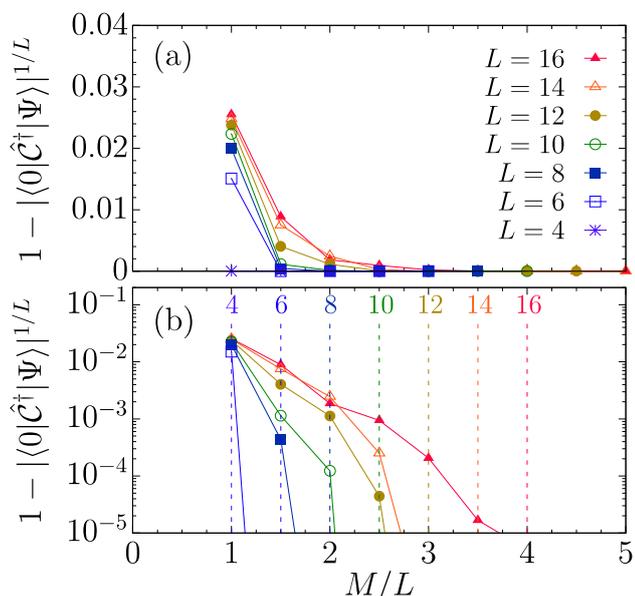


図3: 1次元 XY 模型の基底状態に対して量子回路符号化法を適用した場合の、回路が生成した状態と実際の基底状態との Fidelity のゲート個数依存性。 L は系のサイズ (量子ビット数)、 M は 2 量子ユニタリゲートの個数。赤い点線は、その系のサイズで厳密な回路仮説が存在する個数。(a) は線形、(b) はその対数をとったもの。

4. まとめ

スピン流に関する研究では、本プロジェクトの以前の課題で開発した手法をもとに、スピントロニクス分野への応用を行った。その結果、スピン流を 2 次元ラッシュバ系に注入すると電流渦が発生する現象を発見した。特に、連続体極限においては、ラッシュバ面の垂直方向の全角運動量保存則が成り立ち、スピン角運動量が軌道角運動量に変換されていることが確認できた。

量子-古典ハイブリッドアルゴリズムに関しては、テンソルネットワーク法の知見をもとに、与えられた量子状態に対して自動で量子回路を生成するアルゴリズムを提案した。提案して方法のパフォーマンスを確認するために、量子コンピューティングのシミュレーションを HOKUSAI 上で計算したところ、以前のパラメータを含む変分回路の精度を上回る高精度な回路が得られた。

5. 今後の計画・展望

本年度は、これまで開発した量子多体問題のためのシミュレーションコードをさらに発展させることで、スピントロニクス

など応用分野の開拓を行った。特に、スピン流などを調べるための接合系は複雑であり、これまで量子多体問題のための厳密計算手法を用いた研究は行われてこなかった。したがって、本研究の成功は、量子多体問題のための厳密計算手法が、実際に応用分野で活用できることを示したものである。引き続き、こうした問題の探索にも取り組みたい。

他方、量子化学や量子多体問題は、量子計算機が有効に活用できる分野として注目を集めてきた。特に、NISQ デバイスを有効活用できる方法として、変分量子アルゴリズムが注目されているが、この方法は、依然として、最新鋭の古典計算手法に遠く及ばない精度しか出ていない。今回我々が提案した方法は、実質的には、量子計算機上で特定のテンソルネットワーク法が計算できることを示したものであり、原理的には、古典計算機の計算手法に匹敵する精度が得られる可能性が大いに期待できる。来年度は、これを実際にも実証して、量子計算機が古典計算機の代替になりうることを示し、さらに、場合によっては、古典計算機を凌駕する計算が可能であることを実証したい。

2021 年度 利用報告書

2021 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

[1] Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, Kazuhiro Seki, Hirofumi Sakakibara, Takao Kotani, Hiroaki Ikeda, Seiji Yunoki, “Unified description of cuprate superconductors using four-band d-p model”, *Physical Review Research* **3**, 033157 (2021).

[2] Junji Fujimoto, Florian Lange, Satoshi Ejima, Tomonori Shirakawa, Holger Fehske, Seiji Yunoki, Sadamichi Maekawa, “Spin-charge conversion and current vortex in spin-orbit coupled systems”, *APL Materials* **9**, 060904 (2021).

[3] Florian Lange, Satoshi Ejima, Junji Fujimoto, Tomonori Shirakawa, Holger Fehske, Seiji Yunoki, Sadamichi Maekawa, “Generation of current vortex by spin current in Rashba systems”, *Physical Review Letters* **126**, 157202 (2021).

【口頭発表】

[4] Tomonori Shirakawa, “Encoding an arbitrary quantum state by a quantum circuit”, RIKEN Center for Advanced Intelligence Project-RIKEN Center for Quantum Computing Joint Seminar, Nov. 30, 2021.

【その他(著書、プレスリリースなど)】

[5] 理化学研究所プレスリリース「スピン流で電流の渦を作るー新しいスピン流ー電流変換現象を数値シミュレーションにより発見ー」 https://www.riken.jp/press/2021/20210414_2/index.html